

様式6 (第15条第1項関係)

平成30年4月5日

独立行政法人 日本学術振興会理事長 殿	研究機関の設置者の 所在地	〒565-0871 大阪府吹田市山田丘1-1	
	研究機関の設置者の 名称	国立大学法人大阪大学	
	代表者の職名・氏名	学長 西尾 章治郎 (記名押印)	
	代表研究機関名 及び機関コード	大阪大学	14401

平成29年度戦略的国際研究交流推進事業費補助金
実績報告書

戦略的国際研究交流推進事業費補助金取扱要領第15条第1項の規定により、実績報告書を提出します。

整理番号	R2803	補助事業の 完了日	平成30年3月31日	関連研究分野 (分科細目コード)	生体関連化学 (5305)
------	-------	--------------	------------	---------------------	------------------

補助事業名 (採択年度)	補助金支出額 (別紙のとおり)
グローバル分子技術実装ネットワークの構築 (平成29年度)	¥37,141,590円

代表研究機関以外の協力機関
なし

海外の連携機関
Stanford University (USA), imec (Belgium, The Netherlands), Lawrence Berkeley National Laboratory (USA), Harvard University (USA), Utrecht University (The Netherlands), University of Bordeaux (France), Max Planck Institute, Mainz (Germany), Max Planck Insitute, Stuttgart (Germany), University of Oxford (UK), Technical University of Denmark (Denmark), Forschungszentrum Jülich, GmbH (Germany), Carnegie Mellon University (USA), KU Leuven (Belgium), University of Southampton (UK)

1. 事業実施主体

フリガナ 担当研究者氏名	所属機関	所属部局	職名	専門分野
主担当研究者 たけだ せいじ 竹田 精治	大阪大学	産業科学研究所	教授	固体構造・電子顕微鏡
担当研究者 よしだ よういち 吉田 陽一	大阪大学	産業科学研究所	教授	量子ビーム科学
こざわ たかひろ 古澤 孝弘	大阪大学	産業科学研究所	教授	量子ビーム科学
なかたに かずひこ 中谷 和彦	大阪大学	産業科学研究所	教授	有機化学、生物化学、遺伝子科学
あそ よしお 安蘇 芳雄	大阪大学	産業科学研究所	教授	分子材料化学
まじま てつろう 真嶋 哲朗	大阪大学	産業科学研究所	教授	光化学、放射線

2. 本年度の実績概要

(1) 分子材料計測技術グループ (派遣：3名／招へい：1名)

- ・ 神内 直人助教を 293 日間、Lawrence Berkeley National Laboratory に派遣した。固体触媒表面の原子分解能観察、反応ガス吸着過程解明に取り組み、新たな知見を得た。
- ・ 菅 晃一助教を 257 日間、Stanford University へ派遣した。レーザー変調器を用いた高強度テラヘルツ自由電子レーザーに関する理論的研究を行い、分子構造制御研究等にも応用可能なパルスエネルギーを達成できることを明らかにした。
- ・ 麻生 亮太郎助教を 152 日間、Harvard University に派遣し、TEM を用いた大気圧下での分子材料計測の実験系の構築に関する共同研究に取り組んでいる。
- ・ Stanford University から Timothy Maxwell Professor を吉田研究室へ招へいし、大阪大学にある加速器の応用について打合せを行い、今後の共同研究についての検討も行った。

(2) 分子機能開発技術グループ (派遣：2名／招へい：2名)

- ・ 家 裕隆准教授を 223 日間 Max Planck Institute for Polymer Research に派遣した。有機薄膜型太陽電池材料の研究を行い、アモルファス材料としては世界最高の 9.1% の光電変換効率を得、有機電界効果トランジスタ材料に関しても特性を観測することに成功した。
- ・ 川井 清彦准教授を 200 日間 IMEC に派遣して、半導体チップ上での 1 分子観測を達成するための研究を開始しチップ上への DNA 化学修飾に関する最適化に着手した。
- ・ Akimitsu Narita Project Leader を Max Planck Institute for Polymer Research から招へいし、グラフェンリボンの半導体材料への応用に向けた意見交換を行い、共同研究を開始した。
- ・ Jean-Jacques Toulmé Executive Scientific Director を、University of Bordeaux, IECB から招へいし、RNA を用いた分子技術に関する情報共有と意見交換を行った。

(3) 分子デバイス実装技術グループ (派遣：1名／招へい：2名)

- ・ 張 奕勁博士研究員を 196 日間 Max Planck 研 Stuttgart へ派遣した。遷移金属カルコゲナイドナノチューブの p-n 接合により光電変換効率が 5 倍以上増大することを見出した。
- ・ Sonia Contera 准教授を Oxford 大学から招へいし、液中 AFM を用いたウイルス観察とグラフェン FET によるウイルスの電氣的測定の結果との間に相関があることを見出した。
- ・ Le Thanh Hung 博士を Technical University of Denmark から招へいし、Denmark で合成した熱電半導体を菅沼研の実装技術を用いてフレキシブル熱電デモジュールを作製するとともに、先端実装材料分野および産研内で最新の熱電材料について講演頂いた。

(4) 大規模データ活用分子設計技術グループ (派遣：2名／招へい：2名)

- ・ 靱田 浩義助教を 323 日間、Forschungszentrum Jülich に派遣した。第一原理計算を基盤とした高精度分子設計シミュレーションの技術を習得および層状トポロジカル物質の電子状態に関する理論研究を実施し、国際会議で発表し、共著論文を出版した。
- ・ 武田 龍助教を 201 日間、Carnegie Mellon University に派遣し、未知語問題に対し生成モデルに基づく統計的手法を応用し、未知語検出に有効な中間単位があることを検証した
- ・ Forschungszentrum Jülich から Gustav Bhilmayer 博士を、また Carnegie Mellon University から Alexander I. Rudnicky 教授を招へいし、最新の情報交換や議論を行った。

(5) 国際シンポジウムの開催

大阪大学において「SANKEN JSPS Symposium for the Circulation of Talented Researchers“Global Networking on Molecular Technology Research”」を開催 (2018.1.17) し、分野連携および国際共同ネットワークの構築の強化を図った。

3. 到達目標に対する本年度の達成度及び進捗状況

(1) 分子材料計測技術

- ・ 神内助教は、分子材料計測に必須の走査型トンネル顕微鏡法を習得し、モデル触媒表面の原子分解能観察や吸着ガス分子の可視化に成功し研究計画を十分に達成した。
- ・ 菅助教は、レーザー変調器を用いた高強度テラヘルツ自由電子レーザーについての理論的な研究を行った結果、分子構造制御等の研究にも応用可能な新たな知見を得ており、研究計画を十分に達成したと言える。
- ・ 麻生助教は、TEM の習得等に取り組み、金属酸化物表面の原子分解能観察に成功しており、当初予定の目標をほぼ達成している。
- ・ Stanford University より Maxwell Professor を招へいし、大阪大学に設置された加速器の応用についての打合せおよび今後の共同研究の検討も行った。

(2) 分子機能開発技術

- ・ 家准教授は、次世代分子設計をめざした素子評価と解析に基づき、有機半導体材料の評価を継続した結果、分子構造に由来する興味深い特性および世界最高域の太陽電池特性を得ることに成功し、研究計画を十分に達成したと言える。
- ・ 川井准教授は光ファイバーによる光導波路へのレーザーのカップル、蛍光顕微鏡を用いた 1 分子観測手法を取得し、1 分子 DNA 検出のための半導体チップ設計を行い、DNA 表面処理技術や顕微鏡観測の知見を得ており、当初予定の目標をほぼ達成している。
- ・ Max Planck Institute より Narita Project Leader を招へいし、グラフェンナノリボンの新規半導体材料としての応用に必要不可欠な素子作成技術に関する基板上への薄膜作成方法に関して意見交換を行い、共同研究に向けた分子設計と開発に着手した。
- ・ ボルドー大学から Toulmé Executive Scientific Director を招へいし、in vitro selection に関する技術的課題について助言を得て研究へ反映させるとともに、核酸結合性低分子と RNA 相互作用について議論し、分子設計へのフィードバックを進めている。

(3) 分子デバイス実装技術

- ・ 張博士研究員は、遷移金属カルコゲナイドを用いた受光・発光素子の研究を行った結果、次元性を下げることによって光電変換効率が約 5 倍に上昇することが判明し、本成果をまとめた論文は学術誌への採録が決定しており、研究計画を十分に達成した。
- ・ Contera 准教授をオックスフォード大学から招へいし、Contera 氏が得意とする液中 AFM を用いたウイルス観察と阪大で実施したグラフェン FET によるウイルスの電気的測定の結果との関連を議論した。ウイルス・センシングデバイス開発の重要な知見を得た。
- ・ Hung 博士は産研に滞在し、Denmark で合成した熱電半導体を菅沼研の実装技術を用いてフレキシブル熱電デモジュールを作製した。また、滞在中は、先端実装材料分野および産研内で最新の熱電材料について講演頂いた。

(4) 大規模データ活用分子設計技術

- ・ 靱田助教は、強トポロジカル絶縁体 Bi_2Se_3 と非トポロジカル絶縁体 PbSe から成る層状物質について共同研究を進めた結果、その界面に現れる特異なトポロジカル電子状態に関する知見を得、学術誌への共著論文掲載も行い、目標を十分に達成した。
- ・ 武田助教は、未知語問題検出の研究を行い、検出に有効な中間単位があることを提案検証した。この成果は査読付き国際会議に投稿中であり、当初の目標を達成している。
- ・ 招へいを 2 件実施し、最新の情報交換や議論を行うとともにシンポジウムでの講演を

実施するなど本グループ内にとどまらない情報交換や交流を実現できた。
 以上により、全グループの研究は研究目標達成に向けて順調に進捗している。

4. 日本側研究グループ（実施主体）の研究成果発表状況（本年度分）

①学術雑誌等（紀要・論文集等も含む）に発表した論文又は著書

論文名・著書名 等	
（論文名・著書名、著者名、掲載誌名、査読の有無、巻、最初と最後の頁、発表年（西暦）について記入してください。）（以上の各項目が記載されていれば、項目の順序を入れ替えても可。） ・査読がある場合、印刷済及び採録決定済のものに限って記載して下さい。査読中・投稿中のものは除きます。 ・さらに数がある場合は、欄を追加して下さい。 ・著者名について、責任著者に「※」印を付してください。また、主担当研究者には二重下線、担当研究者については下線、若手研究者については波線を付してください。 ・海外の連携機関の研究者との国際共著論文等には、番号の前に「◎」印を、また、それ以外の国際共著論文等については番号の前に「○」印を付してください。また、主要連携研究者については斜体・太下線、連携研究者については斜体・破線としてください。	
1	Cathode properties of perovskite-type NaMF_3 ($M = \text{Fe, Mn, and Co}$) prepared by mechanical ball milling for sodium-ion battery, A. Kitajou, Y. Ishado, T. Yamashita, <u>H. Momida</u> , <u>T. Oguchi</u> , and ※S. Okada, <i>Electrochimica Acta</i> , 査読有り, 245, 424-429, (2017).
◎ 2	Topological interface states in the natural heterostructure $(\text{PbSe})_5(\text{Bi}_2\text{Se}_3)_6$ with Bi_{Pb} defects, ※ <u>H. Momida</u> , <u>G. Bihlmayer</u> , <u>S. Blügel</u> , K. Segawa, Y. Ando, and <u>T. Oguchi</u> , <i>Phys. Rev. B</i> , 査読有り, 97, 035113/1-6, (2018).
3	Effects of lattice parameters on piezoelectric constants in wurtzite materials: a theoretical study using first-principles and statistical-learning methods, ※ <u>H. Momida</u> and <u>T. Oguchi</u> , <i>Appl. Phys. Express</i> , 査読有り, 11, 041201/1-4, (2018).
4	First-principles calculations on the origin of mechanical properties and electronic structures of 5d transition metal monocarbides MC ($M = \text{Hf, Ta, W, Re, Os, Ir, and Pt}$), M. Fukuichi, ※ <u>H. Momida</u> , M. Geshi, M. Michiuchi, K. Sogabe, and <u>T. Oguchi</u> , <i>J. Phys. Soc. Jpn.</i> , 査読有り, 87, 044602/1-8, (2018).
5	First-principles study on cathode properties of Li_2MTiO_4 ($M = \text{V, Cr, Mn, Fe, Co, and Ni}$) with oxygen deficiency for Li-ion batteries, M. Hamaguchi, ※ <u>H. Momida</u> , and <u>T. Oguchi</u> , <i>J. Phys. Soc. Jpn.</i> , 査読有り, 87, in press, (2018).
◎ 6	<u>Y. Ie</u> ,* K. Morikawa, M. Karakawa, N. B. Kotadiya, G.-J. A. H. Wetzelaer,* <u>P. W. M. Blom</u> ,* <u>Y. Aso</u> *, “Synthesis, properties, and photovoltaic characteristics of p-type donor copolymers having fluorine-substituted benzodioxocyclohexene-annelated thiophene”, <i>J. Mater. Chem. A</i> 5 (2017) 査読有り, 19773-19780.
◎ 7	<u>Y. Ie</u> ,* K. Morikawa, W. Zajazkowski, W. Pisula, N. B. Kotadiya, G.-J. A. H. Wetzelaer,* <u>P. W. M. Blom</u> ,* <u>Y. Aso</u> *, “Enhanced Photovoltaic Performance of Amorphous Donor-Acceptor Copolymers Based on Fluorine-Substituted Benzodioxocyclohexene-Annulated Thiophene”, <i>Adv. Energy Mater.</i> 査読有り, in press.
◎ 8	N. B. Kotadiya, H. Lu, A. Mondal, <u>Y. Ie</u> , D. Andrienko, <u>P. W. M. Blom</u> ; G.-J. A. H. Wetzelaer,* “Universal Strategy for Ohmic hole injection into organic semiconductors with high ionization energies” <i>Nature Mater.</i> 査読有り, 17 (2018) 329-334.
9	Design and synthesis of cyclic mismatch binding ligands (CMBLs) with variable linkers by ring closing metathesis and their photophysical and DNA repeat binding properties, Mukherjee, S.; Dohno, C.; ※ <u>Nakatani, K.</u> <i>Chem. Eur. J.</i> 2017 , <i>23</i> , 11385-11396, DOI: 10.1002/chem.201702064. 査読有り
10	Synthesis of Naphthyridine Carbamate Dimer (NCD) Derivatives Modified with an Alkane Thiol and the Binding Properties to G-G Mismatch DNA, Yamada, T.; Miki, S.; Ullusna, A.; Michikawa, A.; ※ <u>Nakatani, K.</u> <i>Org. Lett.</i> 2017 , <i>19</i> , 4163-4166, doi: 10.1021/acs.orglett.7b01632. 査読有り

11	Synthesis of naphthyridine dimers with conformational restriction and the binding to DNA and RNA, ※ <u>Nakatani, K.</u> ; Natsuhara, N.; Mori, Y.; Mukherjee, S.; Das, B.; and Murata, A. <i>Chem. Asian J.</i> 2017 , <i>12</i> , 3077-3087, doi: 10.1002/asia.201701293. 査読有り
12	Restoration of Ribozyme Tertiary Contact and Function by Using a Molecular Glue for RNA. ※Dohno, C.; Kimura, M.; <u>Nakatani, K.</u> <i>Angew. Chem. Int. Ed.</i> 2018 , <i>57</i> , 506-510, DOI: 10.1002/anie.201709041. 査読有り
◎ 13	Optoelectronic response of a WS ₂ tubular <i>p-n</i> junction, ※ <u>Yijin Zhang</u> , Masaru Onga, Feng Qin, Wu Shi, Alla Zak, Reshef Tenne, <u>Jurgen Smet</u> , and Yoshihiro Iwasa, <i>2D Mater.</i> In press. doi: 10.1088/2053-1583/aab670. 査読有り
○ 14	Single electron-photon pair creation from a single polarization-entangled photon pair、※Kazuyuki Kuroyama, Marcus Larsson, Sadashige Matsuo, Takafumi Fujita, Sascha R. Valentin, Arne Ludwig, Andreas D. Wieck, <u>Akira Oiwa</u> , and Seigo Tarucha、Scientific Reports、査読有り、 7 , 16968,2017.
15	K. Imamura, <u>D. Irishika</u> , <u>H. Kobayashi</u> ※, “Surface nanocrystalline Si structure for highly efficient crystalline Si solar cells”, <i>Prog. Photovolt.</i> 25 (2017) 358-366. 査読有り
16	<u>D. Irishika</u> , Y. Onitsuka, K. Imamura, <u>H. Kobayashi</u> ※, “Improvement of conversion efficiency of silicon solar cells by submicron-textured rear reflector obtained by metal-assisted chemical etching”, <i>Solar RRL</i> , 1 (2017) 1700061-1-4. 査読有り
17	Simultaneous imaging of multiple cellular events using high-accuracy fluorescence polarization microscopy. Kim S, <u>Arai Y</u> , Tani T, Takatsuka H, Saito Y, Kawashima T, Kawakami S, Miyawaki A, and * <u>Nagai T.</u> , <i>Microscopy</i> , 査読有り, 66 , 110-119, 2017
18	Genetically encoded bioluminescent voltage indicator for multi-purpose use in wide range of bioimaging. <u>Inagaki S</u> , Tsutsui H, Suzuki K, Agetsuma M, Arai Y, Jinno Y, Bai G,J. Daniels M, Okamura Y, Matsuda T, and * <u>Nagai T.</u> , <i>Scientific Reports</i> , 査読有り, 7 , 42398, 2017
19	A transient rise in free Mg ²⁺ ions released from ATP-Mg by its hydrolysis contributes to mitotic chromosome condensation. Maeshima K, Matsuda T, Shindo Y, Imamura H, Tamura S, Imai R, Kawakami S, Nagashima R, Soga T, Noji H, Oka K and * <u>Nagai T.</u> , <i>Current Biology</i> , 査読有り, 28 , 444-451.e6, 2018
20	Biomimetic chemical sensing by fluorescence signals using a virus-like particle-based platform. Kushida Y, Arai Y, Shimono K, and <u>Nagai T.</u> , <i>ACS Sensors</i> , 査読有り, 3 , 87-92, 2018
21	Bioluminescent low-affinity Ca ²⁺ indicator for ER with multicolor calcium imaging in single living cells. <u>Nadim H</u> , Suzuki K, Iwano M, Matsuda T and * <u>Nagai T.</u> <i>ACS Chemical Biology</i> , 査読有り, in press
22	Acoustic Model Training based on Node-wise Weight Boundary Model for Fast and Small-footprint Deep Neural Networks. ※ <u>Ryu Takeda</u> , Kazuhiro Nakadai and <u>Kazunori Komatani</u> : <i>Computer Speech & Language</i> , Volume 46, Pages 461-480, November 2017. 査読有り
23	User-Adaptive A Posteriori Restoration for Incorrectly Segmented Utterances in Spoken Dialogue Systems. ※ <u>Kazunori Komatani</u> , Naoki Hotta, Satoshi Sato, Mikio Nakano: <i>Dialogue and Discourse</i> , Vol. 8, No. 2, pp.206-224, 2017. 査読有り
24	対話を通じた未知語のクラス獲得に向けた暗黙的確認の提案. 大野 航平, <u>武田 龍</u> , ニコルズ エリック, 中野 幹生, ※ <u>駒谷 和範</u> : <i>人工知能学会論文誌</i> , Vol.33, No.1, p. DSH-E_1-10, 2018. 査読有り
25	Lexical Acquisition through Implicit Confirmations over Multiple Dialogues. Kohei Ono, <u>Ryu Takeda</u> , Eric Nichols, Mikio Nakano and ※ <u>Kazunori Komatani</u> : <i>Proceedings of 18th Annual SIGDIAL Meeting on Discourse and Dialogue</i> , pp.50-59, 2017. 査読有り
26	Node pruning based on Entropy of Weights and Node Activity for Small-footprint Acoustic Model based on Deep Neural Networks. ※ <u>Ryu Takeda</u> , Kazuhiro Nakadai, <u>Kazunori Komatani</u> : <i>Proceedings of Interspeech-2017</i> , pp.1636-1640, 2017. 査読有り

27	Unsupervised Segmentation of Phoneme Sequences based on Pitman-Yor Semi-Markov Model using Phoneme Length Context. ※ <u>Ryu Takeda</u> , <u>Kazunori Komatani</u> : Proceedings of International Joint Conference on Natural Language Processing (IJCNLP), pp.243-252, 2017. 査読有り
28	Zwama, M., S. Yamasaki, R. Nakashima, K. Sakurai, <u>K. Nishino</u> , and A. Yamaguchi. (2018) Multiple entry pathways within of the efflux transporter AcrB contribute to multidrug recognition. Nature Commun. 査読有り, 9, 124.
29	<u>Nishino, K.</u> (2018) Regulation of the expression of bacterial multidrug exporters by two-component signal transduction systems. Methods Mol. Biol. 1700, 239-151. In Bacterial Multidrug Exporters. Edited by Akihito Yamaguchi and Kunihiko Nishino (Springer)
30	Zwama, M., K. Hayashi, K. Sakurai, R. Nakashima, K. Kitagawa, <u>K. Nishino</u> , and A. Yamaguchi. (2017) Hoisting-loop in bacterial multidrug exporter AcrB is a highly flexible hinge that enables the large motion of the subdomains. Front. Microbiol. 8, 2095.
31	山崎聖司、林克彦、櫻井啓介、中島良介、山口明人、 <u>西野邦彦</u> . (2017) グラム陰性菌の薬剤排出トランスポーター (Drug Efflux Transporters of Gram Negative Bacteria). 細胞 (Cell) 49(11), (533)7-(537)11. 2017年9月号 (2017年8月20日刊行)
32	<u>西野邦彦</u> . (2017) 薬剤耐性における薬剤排出ポンプの役割 (Role of drug efflux pumps in bacterial drug resistance). 化学療法の領域 (Antibiotics & Chemotherapy) 33(5), (1029)79-(1039)89. 2017年5月号 (第33巻 第5号) (2017年4月25日発行)
33	Detecting dynamic responses of materials and devices under an alternating electric potential by phase-locked transmission electron microscopy, <u>Kentaro Soma</u> , <u>Stan Konings</u> , <u>Ryotaro Aso</u> , <u>Naoto Kamiuchi</u> , <u>Genki Kobayashi</u> , <u>Hideto Yoshida</u> , <u>Seiji Takeda</u> , Ultramicroscopy 査読有り, 181 (2017) 27-41.
34	Electron beam induced etching of carbon nanotubes enhanced by secondary electrons in oxygen, <u>Hideto Yoshida</u> , <u>Yuto Tomita</u> , <u>Kentaro Soma</u> , and <u>Seiji Takeda</u> , Nanotechnology 査読有り, 28 (2017) 195301-1--195301-5.
35	Correlation of catalytic activity with the morphology change of supported Au nanoparticles in gas, <u>Tetsuya Uchiyama</u> , <u>Hideto Yoshida</u> , and <u>Naoto Kamiuchi</u> Surf. Sci. 査読有り, 659 (2017) 16-19.

②学会等における発表

発表題名 等	
<p>(発表題名、発表者名、発表した学会等の名称、開催場所、口頭発表・ポスター発表の別、審査の有無、発表年月(西暦)について記入してください。)(以上の各項目が記載されていれば、項目の順序を入れ替えても可。)</p> <ul style="list-style-type: none"> 発表者名は参加研究者を含む全員の氏名を、論文等と同一の順番で記載すること。共同発表者がいる場合は、全ての発表者名を記載し、責任発表者名は「※」印を付けて下さい。発表者名について主担当研究者には<u>二重下線</u>、担当研究者については<u>下線</u>、若手研究者については<u>波線</u>を付けてください。 口頭・ポスターの別、発表者決定のための審査の有無を区分して記載して下さい。 さらに数がある場合は、欄を追加して下さい。 海外の連携機関の研究者との国際共同発表には、番号の前に「◎」印を、また、それ以外の国際共同発表については番号の前に○印を付けてください。また、主要連携研究者については<u>斜体・太下線</u>、連携研究者については<u>斜体・破線</u>としてください。 	
◎ 1	Topological interface states in the natural heterostructure (PbSe) ₅ (Bi ₂ Se ₃) ₆ with Bi antisite defects, ※ <u>H. Momida</u> , <u>G. Bihlmayer</u> , <u>S. Blügel</u> , and <u>T. Oguchi</u> , Ab initio spin-orbitronics, Montesilvano, Italy, ポスター発表, 審査有り, 2017年9月.
2	Topological interface states in the natural heterostructure (PbSe) ₅ (Bi ₂ Se ₃) ₆ with Bi _{Pb} defects, ※ <u>H. Momida</u> , Quantum Theory of Materials Seminar at the FZJ-PGII group, Jülich, Germany, 口頭発表 (セミナー講演), 審査無し, 2018年1月.
3	ウルツ鉱構造物質の圧電性と構造パラメータの相関関係, ※ <u>榎田浩義</u> , <u>小口多美夫</u> , 第65回応用物理学会春季学術講演会, 東京, ポスター発表, 審査無し, 2018年3月.
4	JSPS A3 Foresight, 2nd A3 Roundtable Meeting on Chemical Probe Research Hub, Targeting Trinucleotide Repeat Sequences by Small Organic Molecules, <u>Kazuhiko Nakatani</u> , November 23-26, 2017, Hangzhou (杭州), China

5	第43回反応と合成の進歩シンポジウム、治らない遺伝子疾患を標的にした低分子創成研究、 <u>中谷和彦</u> 、November 6-7, 2017、富山国際会議場
6	JSPS Kickoff symposium for the ZIAM/GBB and ISIR/IPR collaboration, Toward discovery of molecules regulating nucleic acids structure and function, <u>Kazuhiko Nakatani</u> , October 27, 2017, ZIAM, University of Groningen, Groningen, Netherland
7	120th KCS General Meeting, Targeting Diseases-related Trinucleotide Repeat Sequences by Small Organic Molecules, <u>Kazuhiko Nakatani</u> , October 20, 2017, Gwanju (光州)、 Korea
8	Mini-Symposium on Nucleic Acid Chemistry, Targeting Trinucleotide Repeat Sequences by Small Organic Molecules, <u>Kazuhiko Nakatani</u> , October 14, 2017 Pohang University of Science and Technology, Pohang, Korea
9	Optoelectronic properties of tungsten disulfide nanotube <i>p-n</i> junction, <u>Yijin Zhang</u> , Masaru Onga, Feng Qin, Wu Shi, Alla Zak, Reshef Tenne, <u>Jurgen Smet</u> , Yoshihiro Iwasa, APS March Meeting, Los Angeles, US, Oral, 査読無, 2018/03/07
10	<u>H. Kobayashi</u> ※, “Achievement of 20% conversion efficiency from simple structure crystalline Si solar cells fabricated by use of surface structure chemical transfer method”, Taiwan Vacuum Society 2017 (TVS-2017), National Cheng Kung University, Taiwan, Oct. 27 (2017), (口頭発表・審査有 (招待講演))
11	<u>H. Kobayashi</u> ※, “Fabrication and application of Si nanocrystals and nanopowder for energy devices”, EMN Meeting on Surface and interface, Maison Glad Jeju, Jeju island, Korea, May 22-26 (2017). (口頭発表・審査有 (招待講演))
12	<u>Y. Je</u> , * “Non-fullerene Acceptors for Application to Organic Photovoltaics: Structures-Thin-film Properties-Photovoltaic Characteristics Relationship”, 13 th International Conference of Computational Methods in Science and Engineering, Thessaloniki, Greece, 23 April, 2017, 招待講演. 審査無
13	<u>Y. Je</u> , * “Development of New π -Conjugated Systems towards Electronic Device Applications”, ISPAC 2017 International Symposium on Pure & Applied Chemistry 2017, Ho Chi Minh City, Vietnam, 8 June, 2017, 招待講演. 審査無
14	<u>Y. Je</u> , * “Non-fullerene Acceptors for Organic Photovoltaics: Structures-Thin-film Properties-Photovoltaic Characteristics Relationship”, ICMAT2017 9 th International Conference on Materials for Advanced Technologies, Singapore, 21 June, 2017, 招待講演. 審査無
15	<u>Y. Je</u> , * “Novel π -Conjugated Systems for Organic Semiconducting Materials”, 81 st Prague Meeting on Macromolecules, Prague Czech Republic, 12 September, 2017, 招待講演. 審査無
16	<u>Nagai T.</u> : Super-Easy Superresolution Imaging by Spontaneously Photoswitchable Fluorescent Protein. Palais de Congress, Bordeaux, France, 2017.04.12
17	<u>Nagai T.</u> : Bioluminescent indicator applicable to membrane voltage recording in various excitable cell types. (Plenary Presentation) OPTICS & PHOTONICS International Congress 2017, Pacifico Yokohama, 2017.04.19
18	<u>Nagai T.</u> : Acid Resistant Monomeric GFP for Quantitative Single Cell Analyses., the Biophysical Society Thematic Meeting Single-Cell Biophysics: Measurement, Modulation, and Modeling, National Taiwan University, Taiwan, 2017.06.20
19	<u>Nagai T.</u> : Bioluminescent probes for multi-purpose use in wide range of bioimaging, 8th Asia and Oceania Conference on Photobiology, Imperial Palace Seoul Hotel, Korea, 2017.11.15
20	<u>Nagai T.</u> : Super-duper bioluminescent probes for next generation neuroscience. SPIE Photonic West BiOS 2018 Plenary Session, San Francisco, USA, 2018.1.28
21	<u>Kunihiko Nishino</u> , Drug Efflux Transporters of Gram Negative Bacteria and Their Role in Multidrug Resistance, ConBio2017, 2017/12/6, Kobe, Japan

22	New aspects of environmental TEM in catalyst chemistry <u>Seiji Takeda, Ryotaro Aso, Naoto Kamiuchi, Hideto Yoshida, Kentaro Soma</u> ACS 253rd National Meeting & Exposition (米国化学会) April 4, 2017, San Francisco, California, USA
23	New aspects in applying environmental TEM to catalyst chemistry <u>Seiji Takeda, Naoto Kamiuchi, Ryotaro Aso, Kentaro Soma, Hideto Yoshida</u> Symposium: NM4: Novel Catalytic Materials for Energy and Environment MRS Spring Meeting (米国材料科学会), April 19, 2017, Phoenix, Arizona, USA

5. 若手研究者の派遣実績 (計画)

【海外派遣実績 (計画)】

年度	平成 28 年度	平成 29 年度	平成 30 年度	合計
派遣人数	6 人	8 人 (5 人)	5 人 (3 人)	11 人

※当該年度は実績、次年度以降は計画している人数を記載

【本年度の海外派遣実績】

派遣者①の氏名・職名：靱田 浩義・助教

(当該若手研究者の国際共同研究における役割を含めた具体的な研究活動)				
派遣者は第一原理計算を用いた固体物性理論を専門としており、データ活用分子設計技術とナノ計算解析技術を駆使した材料機能設計に取り組んでいる。派遣先である Forschungszentrum Jülich の Blügel 博士グループに滞在し、量子論に基づく最先端の計算手法について理解を深め、その技術を習得する。量子シミュレーション技術を活用し、機能性材料の電子・スピン物性に関する理論的研究を派遣先グループと共同で進める。				
(具体的な成果)				
第一原理計算を基礎とした物性解析手法やその物質科学研究への応用に関して詳細なディスカッションを定期的に行った。強トポロジカル絶縁体 Bi_2Se_3 と非トポロジカル絶縁体 PbSe から成る層状物質について共同研究を進め、その界面に現れる特異なトポロジカル電子状態に関する知見を得た。その共同研究成果は国際会議で発表し、論文は学術誌に出版された。				
派遣先 (国・地域名、機関名、部局名、受入研究者)	派遣期間			合計
	平成 28 年度	平成 29 年度	平成 30 年度	
ドイツ、Forschungszentrum Jülich、 Peter Grünberg Institute、Stefan Blügel	73 日	323 日	0 日	396 日

派遣者②の氏名・職名：張 奕勁・博士研究員

(当該若手研究者の国際共同研究における役割を含めた具体的な研究活動)				
張氏は遷移金属カルコゲナイド(TMD)が持つ特異な物性を活かしたデバイス応用の可能性を探る研究を行っている。これら物性の出現は TMD の低次元性や低結晶対称性に負うところが大きい。派遣先である Max Planck Institute for Solid State Physics の Smet 博士のグループは低次元材料の電気伝導や光学物性の研究で世界をリードする研究を行っているが、TMD に関する研究はこれまで行われていなかった。Smet 博士と派遣者の共同研				

究により TMD の実用デバイスへの応用を推進する。

(具体的な成果)

本年度は TMD の次元性が発光・受光素子に与える影響についての研究を行った。具体的には、本来二次元材料である TMD をチューブ状に丸めて擬一次元にした TMD ナノチューブ中に p-n 接合を形成し、これを用いた発光・受光素子の製作および評価を試みた。当該物質における p-n 接合の形成は本研究において始めて実現した。また、特に受光時において、光から電気への変換効率の大幅な上昇が確認された。試料に吸収された光量で規格化された内部量子効率で比較したところ、二次元の状態に比べて効率が約 5 倍に増幅されていた。この増幅のメカニズムについては今後明らかにしていく予定であるが、擬一次元系の表面のみに存在可能な表面プラズモンの影響では無いかと考えられる。p-n 接合の形成と変換効率の大幅の上昇の確認については既に論文にとりまとめ、学術誌に採録が決定した。

派遣先 (国・地域名、機関名、部局名、受入研究者)	派遣期間			合計
	平成 28 年度	平成 29 年度	平成 30 年度	
ドイツ・Stuttgart、Max Planck Institute for Solid State Research、Solid State Nanophysics、Jurgen Smet	120 日	196 日	0 日	316 日

派遣者④の氏名・職名：家 裕隆・准教授

(当該若手研究者の国際共同研究における役割を含めた具体的な研究活動)

派遣者家裕隆はこれまで有機合成化学・構造有機化学に基づく機能性 π 電子系開発を切り口とした分子技術で、新規なエレクトロニクス材料の開発を行っている。さらに、創出した化合物の分子構造－基礎物性－素子機能の相関を解明することで、目的とする機能発現に向けた分子設計指針を確立してきている。しかし、世界最高峰の特性や機能を実現するためには、最先端のデバイス拠点との国際共同研究を通じた化合物評価と、測定結果から得られる知見の化合物設計へのフィードバックが必要不可欠である。そこで、今年度の計画においては、産業科学研究所の申請者が所属する研究室が分子開発を担当し、派遣者家裕隆が共同研究先のマックスプランク研究所マインツで素子評価と解析、および、これら研究結果からの次世代分子設計の創出の役割を担う。

(具体的な成果)

本年度は昨年度までの知見をもとに、有機電界効果トランジスタ材料、および、有機薄膜型太陽電池材料のより詳細な特性評価を行った。その結果、トランジスタ材料に関しては、家裕隆が施した分子構造修飾が安定な素子駆動に有効であるとの知見を得ることができた。太陽電池材料に関しては、第一世代のポリマーが 7.3%の光電変換特性を示すことを明らかとした。さらに第二世代ポリマーはアモルファス材料としては世界最高の 9.1%の光電変換効率を得ることに成功した。さらに、新たな共同研究として有機電界発光素子材料の開発に着手した。

派遣先 (国・地域名、機関名、部局名、受入研究者)	派遣期間			合計
	平成 28 年度	平成 29 年度	平成 30 年度	
Mainz・ドイツ、Max Plank Institute、Mainz Laboratory、Paul Blom	88 日	223 日	0 日	311 日

派遣者⑤の氏名・職名：神内 直人・助教

(当該若手研究者の国際共同研究における役割を含めた具体的な研究活動)

神内助教は触媒化学を専門としており、当研究室では環境制御型透過電子顕微鏡 (ETEM) を用いた原子分解能その場観察に取り組んでいる。一方、派遣先の Salmeron 教授は表面科学の大家であり、ガスを導入可能な準大気圧 X 線光電子分光法 (AP-XPS) などを開発し、様々な物理現象を明らかにされてきた。本研究では、神内助教を中心として、反応ガス中の固体触媒表面を分子材料計測 (ETEM, STM, AP-XPS など) により多角的に検討し、触媒反応機構に関する新たな知見を得ることを目指す。

(具体的な成果)

H29 年度は、その場観察技術の基礎である低温走査型トンネル顕微鏡法 (LT-STM) を習得し、モデル触媒である金属単結晶表面の原子分解能観察に取り組んだ。Ar スパッタや焼成温度・時間などの前処理条件や、トンネル電流、探針-サンプル間にかかる電圧、走査速度などの観察条件を詳細に検討することにより、金属単結晶表面の原子配列を可視化することに成功した。その後、金属単結晶表面へ反応ガスを導入し、単結晶表面へ反応ガスが吸着する過程をその場観察した。さらに、複数の反応ガスを導入した場合の吸着過程についても調べた。これらの実験結果は、モデル触媒を用いた低温 (77K) での実験ではあるが、触媒上の反応開始機構に関する新たな知見を与えるものであり、学術的に有意義な成果が得られたと考えられる。また、派遣期間終了後も、派遣先の Prof. Salmeron と実験結果の解析について議論しており、国際誌への論文投稿を目指している。

派遣先 (国・地域名、機関名、部局名、受入研究者)	派遣期間			合計
	平成 28 年度	平成 29 年度	平成 30 年度	
アメリカ合衆国、Lawrence Berkeley National Laboratory、Materials Science Division、Miquel Salmeron	70 日	293 日	0 日	363 日

派遣者⑥の氏名・職名：菅 晃一・助教

(当該若手研究者の国際共同研究における役割を含めた具体的な研究活動)

超短パルス (フェムト秒・アト秒) の量子ビーム (電子ビーム、X 線) や電磁波 (テラヘルツ波) は、新しい分子材料計測技術の研究を進めるためのツールとして期待されている。派遣者は、超短パルスの電子ビーム発生・計測・利用技術を確立し、分子材料計測技術としての応用展開を進めている。派遣先のアメリカ合衆国 Stanford University は、世界有数の大型電子ビーム加速器 (LCLS, linac coherent light source) を有し、数々の超短パルスの量子ビーム発生・応用技術について顕著な成果を挙げている研究機関である。Huang 博士らのグループは、最先端の電子ビームのパルス圧縮技術、電子ビーム計測技術、自由電子レーザーを用いた X 線レーザー発生・応用技術開発を行っている第一人者である。共同研究により、高強度テラヘルツ光源の開発を行い、新しい分子材料計測技術開発を推進する。

(具体的な成果)

物質科学におけるテラヘルツ電場による非線形現象や分子構造制御の応用を目指して、レーザー変調器を用いた高強度テラヘルツ自由電子レーザーについての理論的な研究を

行った。レーザー変調器は電子ビームのスライスエネルギー分散を変調し、パルス圧縮器によりテラヘルツ密度変調電子ビームを生成できることが明らかとなった。大阪大学に設置されている電子ビームエネルギー35 MeVの加速器を用いた開発も視野に入れ、自由電子レーザーにより得られるテラヘルツ収量のシミュレーションを行った。その結果、2~10 THzにおいて、パルス圧縮器の最適化により電子ビームの最大のパンチングファクターは0.3となった。また分子構造制御の研究にも応用可能である、100 μJオーダーのテラヘルツパルスエネルギーを達成できることが明らかとなった。

派遣先 (国・地域名、機関名、部局名、受入研究者)	派遣期間			合計
	平成 28 年度	平成 29 年度	平成 30 年度	
アメリカ合衆国・California、 Stanford University、Department of Applied Physics、Zhirong Huang	60 日	257 日	0 日	317 日

派遣者⑦の氏名・職名：武田 龍・助教

(当該若手研究者の国際共同研究における役割を含めた具体的な研究活動)

分子技術の出口として人間と機械のインタラクションを実現するにあたり、音声は不可欠なメディアである。音声認識には誤りが生じるのが最大の欠点であり、柔軟なインタラクションの実現にはこれを補う技術が必須である。Alexander I. Rudnicky 教授は計算機科学・音声認識の分野での長い経験と深い知見を有する。一方、武田助教は音声信号処理や音声認識を専門としている。本研究は武田助教が中心に進め、音声認識誤りに頑健な対話管理を大量のデータから統計的に学習する手法の開発を行う。これを、従来音声認識内部で用いられている統計モデルとシームレスに繋げることにより、様々な階層を縦断した統計的音声対話技術への新たな展開を図る。

(具体的な成果)

本年度は、音声認識誤りの原因の一つである未知語問題への対応、および、その音声認識プログラムの開発を進めており、研究はおおむね順調に進んでいる。通常、音声認識の辞書に登録されていない単語は認識できない(未知語問題)。これに対し、生成モデルに基づく統計的手法を応用し、音素認識結果から未知語を自動的に検出する。音素や音節よりも未知語検出に有効な音の単位があることを検証し、その自動推定の一実装を提案した。また、関連するアルゴリズムの整備も進めている。現時点までの成果をまとめ、査読付き国際会議へ投稿した。派遣後半は、対話管理の研究を進め、音声認識と対話管理を統合する技術の開発を進める予定である。

派遣先 (国・地域名、機関名、部局名、受入研究者)	派遣期間			合計
	平成 28 年度	平成 29 年度	平成 30 年度	
アメリカ合衆国、Carnegie Mellon University、School of Computer Science、Alexander I. Rudnicky	0 日	201 日	159 日	360 日

派遣者⑨の氏名・職名：麻生 亮太郎・助教

(当該若手研究者の国際共同研究における役割を含めた具体的な研究活動)

ナノ材料の原子分解能での解析には電子顕微鏡は必須のツールであり、多様な観察対象

に応じた観測法の構築が不可欠である。派遣予定者の麻生助教は、透過電子顕微鏡(TEM)を用いた原子スケール構造解析の専門家であり、金属・酸化物の表面・界面における気体分子との相互作用に関して環境制御型 TEM を用いて研究してきた。ハーバード大学の David C. Bell 教授は、低加速の高分解能 TEM の理論・応用研究の第一人者であり、電子線ダメージに弱いナノ材料の可視化を世界最高レベルの空間分解能で実現してきた。共同研究により、低加速電子線と環境制御を組み合わせた観察・解析法を構築することで、従来観測が困難であった固体表面における原子・分子のダイナミクスを実時間・原子スケールで明らかにする。表面の化学反応を解明することで、量子材料や触媒における新規ナノ材料の創出を目指す。なお、平成 28 年 11 月下旬に研究打ち合わせのために派遣先へ一週間出張し、同地で行われる米材料学会での Bell 教授の講演も合わせて聴講する。

(具体的な成果)

H29 年度は、大気圧までのガスが導入可能な TEM 用ホルダーを用いた測定法の習得と実験系の構築に注力した。気体種、加熱温度、保持時間などの観察条件を検討し、金属酸化物表面における原子分解能観察を行い、酸化還元条件における内部の構造変化は電子線回折を用いて解析した。さらに金属酸化物単結晶の表面観察のために、集束イオンビーム(FIB)、プラズマ処理、Ar ミリングによる試料作製法を習得し、ガス中観察可能な金属酸化物薄膜の作製に成功した。現在、TEM に新たなガス導入機構を導入中であり、次年度は、本機構を用いた実験系を構築し、実環境下における金属酸化物表面の構造変化を実時間・原子スケールで明らかにすることを次年度の方針にした。

派遣先 (国・地域名、機関名、部局名、受入研究者)	派遣期間			合計
	平成 28 年度	平成 29 年度	平成 30 年度	
アメリカ合衆国、Harvard University、School of Engineering and Applied Sciences、David C. Bell	0 日	152 日	208 日	360 日

派遣者⑩の氏名・職名：川井 清彦・准教授

(当該若手研究者の国際共同研究における役割を含めた具体的な研究活動)

光を用いた分析・化学反応の制御は、極微量分析および空間時間を制御した分子創製において鍵となる分子技術である。派遣予定者の川井准教授は、機能性分子の創製、その光化学反応を速度論的に解明し、得られた知見を用いて化学反応を制御することを通して、光分析法の開発について研究してきた。分子技術実装のためには、分子技術の既存のデバイスへの適応、あるいは、分子技術を活用可能なデバイスの開発が必須となる。派遣先の IMEC の Wim Van Roy 博士は、半導体技術の研究者であり、当研究部門トップの Jo De Boeck CEO のもとで研究を進めており、研究室には複数の半導体デバイスが存在し、また、デバイス開発に関する種々のノウハウが蓄積されている。共同研究により、既存の分子技術の半導体デバイスへの応用、半導体デバイスに適応可能な分子技術の開発を通して、極微量分析、そして、空間時間を制御した分子創製を可能とする技術開発を目指す。

(具体的な成果)

本年度は、半導体チップ上での 1 分子観測を達成するための、光ファイバーによる光導波路へのレーザーのカップル、および、蛍光顕微鏡を用いた 1 分子観測手法を取得した。半導体チップ上での 1 分子 DNA 検出を行な上でのチップの設計、チップ上への DNA の

表面処理技術、顕微鏡観測に関する知見を得ることができた。これらの成果をもとに、チップ上への DNA 化学修飾に関する最適化に着手した。				
派遣先 (国・地域名、機関名、部局名、受入研究者)	派遣期間			合計
	平成 28 年度	平成 29 年度	平成 30 年度	
ベルギー・Leuven、imec、Jo De Boeck	0 日	200 日	110 日	310 日

※本年度の派遣者毎に作成すること。

6. 研究者の招へい実績 (計画)

【招へい実績 (計画)】

年度	平成 28 年度	平成 29 年度	平成 30 年度	合計
招へい人数	4 人	7 人 (3 人)	10 人 (5 人)	13 人

※当該年度は実績、次年度以降は計画している人数を記載

【本年度の招へい実績】

招へい者①の氏名・職名：Alexander I. Rudnicky・Research Professor

(当該研究者の国際共同研究における役割を含めた具体的な研究活動)				
本プロジェクトの主要連携研究者であり、主要研究者と産研の研究担当者が対面で相談する機会を持つために、Rudnicky 博士を招聘する。同時に、翌年度以降の若手派遣計画や共同研究の詳細についても議論する。				
(具体的な成果)				
2018 年 1 月 10 日から 1 月 18 日の 9 日間、駒谷研究室に招へいした。この間に、対話中の知識獲得に関する研究や知識グラフを用いた対話システムにおける未知項目の予測について複数回議論を行い、現状認識を含め相互理解を深めた。さらに駒谷研究室において未知語獲得を行う対話システムや、発話に対して相づちを打つシステムのデモを見学し、意見交換を行った。また“Blended Conversations”というタイトルで講演を行っていただき、本研究プロジェクトのシンポジウムにも出席していただくなど、受入研究室に留まらず多面的に意見交換を行った。また、派遣中である武田助教とともにしている共同研究についても意見を交換した。				
招へい元 (機関名、部局名、国名) 及び 日本側受入研究者 (機関名)	招へい期間			合計
	平成 28 年度	平成 29 年度	平成 30 年度	
Carnegie Mellon University、School of Computer Science、アメリカ合衆国、駒谷和範 (大阪大学)	0 日	9 日	5 日	14 日

招へい者③の氏名・職名：Akimitsu Narita、Project Leader

(当該研究者の国際共同研究における役割を含めた具体的な研究活動)				
有機合成を駆使して、 π 電子系を拡張した数十ナノメートルスケールのグラフェンナノ				

シートやグラフェンリボンを創出することができる世界屈指の合成研究者である成田氏を招へいし、招へいプログラムを通じて、これら材料の合成手法を導入し、新規材料開発を産業科学研究所内の合成グループで取り組む。さらに、基礎物性とエレクトロニクス素子機能を明らかにする観点から、当研究所の最新機器・設備を用いた評価を実施するとともに、この実験結果を理論研究グループの解析で明らかにする。

(具体的な成果)

昨年度に引き続き、グラフェンナノリボンの電極基板上への薄膜作製と表面解析に関する手法を習得するとともに、薄膜半導体材料への応用に向けた研究への展開を継続した。さらに、Narita 氏が見出した新規骨格の機能評価に向けて、大阪大学産業科学研究所との共同研究に着手した。

招へい元（機関名、部局名、国名）及び 日本側受入研究者（機関名）	招へい期間			合計
	平成 28 年度	平成 29 年度	平成 30 年度	
Max Plank Institute、Mainz Laboratory、 ドイツ、安蘇芳雄・家 裕隆（大阪大 学）	21 日	23 日	30 日	74 日

招へい者④の氏名・職名：Sonia Contera・Associate Professor

(当該研究者の国際共同研究における役割を含めた具体的な研究活動)

我々の作成した、グラフェン上の 1) 修飾糖鎖、2) ヘマグルチニンの糖鎖への修飾、3) ノイラミニダーゼのシアル酸切断およびヘマグルチニン剥離、4) ザナミビル投与によるノイラミニダーゼ不活化を液中 AFM で観察し、我々の電気測定との対応を明らかにする。

(具体的な成果)

グラフェン上の 1) 修飾糖鎖、2) ヘマグルチニンの糖鎖への修飾、3) ノイラミニダーゼのシアル酸切断およびヘマグルチニン剥離、4) ザナミビル投与によるノイラミニダーゼ不活化を、Oxford University の液中 AFM 技術を用いて観察した。この結果について、Contera 准教授を招へいし、討論した。この研究は、ウィルスセンシングデバイス開発研究の基盤となるものである。

招へい元（機関名、部局名、国名）及び 日本側受入研究者（機関名）	招へい期間			合計
	平成 28 年度	平成 29 年度	平成 30 年度	
University of Oxford、Department of Physics、イギリス、松本和彦（大阪 大学）	9 日	5 日	0 日	14 日

招へい者⑤の氏名・職名：Jean-Jacques Toulmé・Executive Scientific Director

(当該研究者の国際共同研究における役割を含めた具体的な研究活動)

「SANKEN JSPS Symposium for the Circulation of Talented Researchers“Global Networking on Molecular Technology Research”」に出席し、全体的な運営と他の主要研究者との意見交換の場を持った。また、産研にて「RNA アプタマーの基礎と最先端」に関する講演会を開催し、RNA を用いた分子技術の新展開について学ぶとともに、我々が持つ技術的課題について、助言を求めた。さらに、平成 30 年度の派遣受入について具体

的に相談した。

(具体的な成果)

1) RNA アプタマー (標的分子に結合する RNA) のライブラリーからの探索 (in vitro selection) について、Toulmé 博士の実績を学ぶことができた。

2) 中谷研究室で進めている in vitro selection に関する技術的課題を説明し、それぞれの課題についての的確な助言を得た。特に、in vitro selection 法による探索効率、ならびに、探索の成否について議論し、本手法が「探索」手法であり、必ず探索できるとは限らない点について、理解することができた。

3) 具体的な実験方法について、不適當な条件、操作の有無を確認いただき、手法、操作については問題ないことが確認できた。

4) 中谷研究室で開発している核酸結合性低分子と RNA の相互作用について、その本質に関する意見交換を行い、標的 RNA に結合する分子の設計可能性について、改めてその困難さを理解した。

5) 平成 30 年度に、中谷研柴田助教の派遣受入について、具体的な手続き、研究内容、研究の進め方について相談し、Toulmé 博士が進めている化学修飾された核酸塩基を含むアプタマーの分子技術、分子センサーへの応用を進めることとした。

招へい元 (機関名、部局名、国名) 及び 日本側受入研究者 (機関名)	招へい期間			合計
	平成 28 年度	平成 29 年度	平成 30 年度	
University of Bordeaux、 Institute of European Chemistry and Biology (IECB)、フランス、中谷和彦 (大阪大学)	0 日	6 日	10 日	16 日

招へい者⑩の氏名・職名 : Le Thanh Hung ・ Postdoctoral Researcher

(当該研究者の国際共同研究における役割を含めた具体的な研究活動)

Le Thanh Hung 氏は、熱電半導体を基板へ直接接合した熱電モジュールの設計・開発をしている。半導体の電氣的・熱的・機械的接合(実装)技術は、金属、半導体および有機分子材料を分子レベルで精密に界面設計することが要求される。これらの研究・開発には、菅沼研の電子材料における異相界面の接合技術や、その信頼性向上に寄与するノウハウを活用することができる。Le Thanh Hung 氏は同分野で Nong 博士と共に成果を挙げているため、菅沼研究室へ滞在し、これらのノウハウについて技術や情報交換を行った。また、最新の熱電半導体材料を用いた熱モジュールの信頼性向上について、研究・開発を相互に進めている。

(具体的な成果)

Denmark で合成した熱電半導体を阪大産研 (菅沼研) の実装技術を用いてフレキシブル熱電デモジュールを作製した。

招へい元 (機関名、部局名、国名) 及び 日本側受入研究者 (機関名)	招へい期間			合計
	平成 28 年度	平成 29 年度	平成 30 年度	
Technical University of Denmark、 Department of Energy Conversion and Storage、デンマーク、菅沼克昭 (大阪大学)	58 日	2 日	0 日	60 日

招へい者⑬の氏名・職名：Timothy Maxwell・Professor

(当該研究者の国際共同研究における役割を含めた具体的な研究活動)
 超短パルスの量子ビーム（電子ビーム、X線）は、新しい分子材料計測技術を開発するためのツールとして期待されている。Maxwell 教授は、電子ビームとエネルギー変調操作に関する研究の第一人者である。Maxwell 教授との共同研究により、分子材料計測技術開発のための、周期構造を利用した電子ビームエネルギー変調構造の開発・最適化に関する研究を推進する。

(具体的な成果)

平成 29 年 10 月に 9 日間招へいし、大阪大学に設置された加速器の応用についての打合せを行った。Stanford University においても電子ビームを用いたテラヘルツ波の発生・計測を行っており、加速器周辺の装置（阪大の設備、レーザー変調器およびビーム診断用偏向空洞の可能性）についての議論を行った。また、今後の共同研究として、小型加速器を用いた密度変調電子ビームによる高強度テラヘルツ自由電子レーザーの可能性についての検討も行った。

招へい元（機関名、部局名、国名）及び 日本側受入研究者（機関名）	招へい期間			合計
	平成 28 年度	平成 29 年度	平成 30 年度	
Stanford University、SLAC National Accelerator Laboratory、アメリカ合衆国、吉田陽一（大阪大学）	0 日	9 日	10 日	19 日

招へい者⑭の氏名・職名：Gustav Bihlmayer・Scientific Staff

(当該研究者の国際共同研究における役割を含めた具体的な研究活動)

Forschungszentrum Jülich の Gustav Bihlmayer 博士は、第一原理計算コード FLEUR の中心的な開発者であり、表面・界面・ナノ構造物質等における電子状態や磁性に関する理論研究を専門としている。特にトポロジカル物質の電子状態理論などで優れた成果を挙げている。Bihlmayer 博士をユーリッヒ研究所から招へいし、先端エレクトロニクス・スピントロニクスデバイス等の開発に必要な物質・材料の基礎物性評価技術に関する共同研究について議論を行う。新奇物性発現とデバイス応用に関する情報交換を行い、大規模データ活用分子設計技術の構築を効果的に推進する。

(具体的な成果)

層状トポロジカル物質の電子状態や磁性に関する計算材料科学研究に関して、2018 年 1 月に開催された本プロジェクトのシンポジウム及び小口研セミナーで講演を行った。第一原理計算手法や新奇トポロジカル物質に関する最新の情報交換を行った。Gustav Bihlmayer 博士および Stefan Blügel 博士との共同研究成果の一部は共著論文として出版された。

招へい元（機関名、部局名、国名）及び 日本側受入研究者（機関名）	招へい期間			合計
	平成 28 年度	平成 29 年度	平成 30 年度	
Forschungszentrum Jülich、Peter Grünberg Institute、ドイツ、小口多美夫（大阪大学）	0 日	5 日	0 日	5 日

※本年度の招へい者毎に作成すること。

7. 翌年度の補助事業の遂行に関する計画

--

※ 補助事業が完了せずに国の会計年度が終了した場合における実績報告書には、翌年度の補助事業の遂行に関する計画を附記すること。